

## Java を用いた分子の対称性と基準振動に関する学習プログラム

榊原 正明・増原 良子・高見 和邦・福井 裕暁  
物質工学科

### An Educational Computer Software Program using Java for Molecular Symmetry and Normal Vibrations

Masaaki SAKAKIBARA, Ryoko MASUHARA, Kazukuni TAKAMI and Hiroaki FUKUI

Department of Materials Science, Faculty of Engineering  
Tottori University, Tottori, 680-8552 Japan  
E-mail: sakaki@chem.tottori-u.ac.jp

**Abstract:** A computer software program which uses Java for molecular symmetry and normal vibrations calculated by the GF method was designed. The contents of the software program are as follows.

- explanation of the motion of molecules
- calculation of the vibrations of diatomic molecules
- explanation of eigenvalues and eigenvectors
- explanation of the GF method
- a sample problem on the GF method for practice
- a normal vibration calculation for about six kinds of molecule types ( $H_2O, H_2O_2, NH_3, BH_3, CH_4, CO_2$ )
- explanation of the use of symmetry in vibrational problems
- a sample problem on the use of symmetry in vibrational problems for practice

A file for the learner is made in the server, the results of the practice problems are recorded in it, and the file shows both whether the answer is correct or incorrect as well as the type of mistake.

**Keywords:** Java, Normal vibrations, Network, Molecular symmetry, G F method

#### 1. はじめに

プログラミング言語である Java は、インターネットに対応するライブラリが用意されており、それによってネットワークを介してプログラムをダウンロードし、Web ブラウザ上でプログラムの実行ができるという点で注目されている。このような Java の特徴を生かした物理、化学の教材は、現在数多く存在している[1], [2].

これらの Java を用いた教材は、Web 上で実行される Java プログラム (Java アプレット) のみを用いたものが主流である。今回は、Java アプレットと、スタンドアロンで実行される Java プログラム (Java アプリケーション) を組み合わせて用いることにより、従来行われてきた Java の適用例の多くとは異なる角度から、化学教材に対する適用性への検討を試みた。

当研究室では、1997 年に BASIC 言語を用いて、基準振動の学習プログラム [3] を作成した。このプログラムはスタンドアロンで実行されるもので

あったが、今回、このプログラムの内容を充実させ、Java 言語を用いることにより Web 上で実行できるようにした。合わせて Java の適用性について検討を行った。

#### 2. 基準振動と GF 法 [4], [5], [6], [7]

多原子分子の運動エネルギー、位置エネルギーをそれぞれ  $T$ ,  $V$  とおくと

$$T = \frac{1}{2} \dot{\overline{X}} M \dot{\overline{X}} \quad (1)$$

$$V = \frac{1}{2} \overline{R} F R \quad (2)$$

ただし、 $X$  は各原子の直交座標を要素とする列ベクトル、 $M$  は各原子の質量を対角項にもつ行列、 $R$  は分子内座標を要素にもつ列ベクトル、 $F$  は力の定数を要素にもつ行列である。

$$R = BX \text{ とすれば, } \dot{R} = B \dot{X} \quad (3)$$

Xの全ての要素に共役な運動量を要素にもつ列ベクトルを $P_X$ とし, Rの全ての要素に共役な運動量を要素にもつ列ベクトルを $P_R$ とすると,

$$P_X = \widetilde{B} P_R = M \dot{X} \text{ より}$$

$$\dot{X} = M^{-1} \widetilde{B} P_R \quad (4)$$

(3)と(4)より  $G = BM^{-1}\widetilde{B}$  とすれば

$$\dot{R} = B \dot{X} = BM^{-1}\widetilde{B} P_R = G P_R$$

$P_R = G^{-1} \dot{R}$  を(4)に代入して

$$\dot{X} = M^{-1} \widetilde{B} G^{-1} \dot{R} \quad (5)$$

(1)に(5)を代入して

$$T = \frac{1}{2} \widetilde{R} G^{-1} \dot{R}$$

T, Vが共通の座標系で表せたので, GF行列の固有値を求める.  $GFL = L\Lambda$ となる.

$R = LQ$  (6)より列ベクトルQを導入する.

(6)を(2), (5)に代入すると

$$V = \frac{1}{2} \widetilde{Q} \Lambda Q$$

$$T = \frac{1}{2} \widetilde{Q} \dot{Q}$$

となる.

$\Lambda$ の対角項の要素 $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ をそれぞれ基準座標といい, 基準座標による振動を基準振動という. 今回 Urey-Bradley 力場を用いた.

### 3. Java の特徴

#### 3. 1. 1 Java のもつ2つの動作形態

Java で書かれたプログラムは, 動作形態の違いにより, Java アプレットと Java アプリケーションの2つに大別される. Java アプレット, Java アプリケーションの概要は以下に示すようなものである.

##### • Java アプレット

ネットワークで接続されたクライアント/サーバ型の環境を必要とするもので, サーバに格納されており, クライアント側からの呼び出しに応じてダウンロードされ, クライアントマシン上で

は, ディスクではなくメモリ上に常駐して実行される.

クライアントマシン上に配信されて実行されるという性質から, 厳しいセキュリティ制限が設けられている. 代表的なものとして, クライアントマシン上では, ダウンロードされた Java アプレットとローカルディスクとのアクセスができない, さらに, アプレットは配信元であるサーバマシン以外とはネットワーク接続を確立できない, などがある.

##### • Java アプリケーション

マシンのディスク中に格納されて通常のソフトウェアのように実行される. したがって, 実行しているマシン上では, そのマシンのハードディスクとのアクセスが可能である.

#### 3. 1. 2 Java アプレットとファイル操作について

Java アプレットのセキュリティ制限により, クライアントで実行されている Java アプレット内のデータは, そのクライアントマシンのハードディスクに保存することができない.

そこで, アプレット内のデータを保存する場合には, Java アプレットと Java アプリケーションを同時に用いて, クライアント側の Java アプレット内のデータを, サーバ側でのファイル操作によってサーバのハードディスクに保存を行う.

このためには, サーバ上にファイル操作を行う常駐アプリケーションが必要であり, 次の URL のものを使用した.

<http://www.njk.co.jp/otg/Study/horb/>

今回は Web サーバとして Windows95 を用いた.

Windows95 上での Web サーバとして, httpd 1.34d を用いた[8]. サーバマシンとして PC9821, VALUESTAR, V20 を用いた.

処理の流れをまとめると次のようになる.

- ① サーバに, ファイル操作を行うようコーディングされた Java アプリケーションを常駐しておき, Java アプレットの配送を行う.
- ② Java アプレットによって, Java アプレット内のデータをサーバへ送信し, サーバに常駐している Java アプリケーションに, ファイルの生成, データの保存を要求する.
- ③ サーバに送信されたデータを常駐アプリケーションによってハードディスクに保存す

る。  
以上の流れを図3-1に示す。

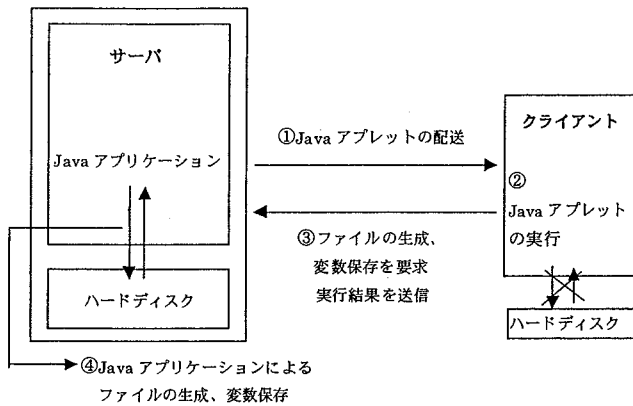


図3-1 Java アプレットとファイル操作

### 3. 1. 3 双方向性における Java アプレットと CGI の相違点

Web 上で双方向性をもたせるものとしては CGI が代表的である。CGI と Java アプレットの相違点は、プログラムを実行するのが CGI ではサーバ側であるのに対して、Java アプレットではクライアント側の Web ブラウザ上である、という点である。

CGI ではサーバに一方向的に負荷をかけるが、Java アプレットはそうではない。

また、Java アプレットではクライアント側でのプログラムの実行結果により、アニメーションやグラフィックなどが可能となる。

CGI ではクライアント側でのプログラムの実行が不可能であるためそれはできない。

### 3. 2 Java 適用のメリット

Java を用いるメリットとして次のようなことが挙げられる。

- ① クライアント上で実行される Java アプレットを用いることで、サーバの負荷を軽減できる。特に、高次元行列の計算などのプログラムを、複数の人が同時に実行する場合、クライアント上の Java アプレットとサーバ上の Java アプリケーションを組み合わせることにより、実行結果のすばやい表示が行えるなどの利点がある。
- ② クライアント上で実行された Java アプレット内の実行結果などのデータの保存を、サー

バに常駐している Java アプリケーションに行わせる。この際、Java では、サーバに複数の人が同時にアクセスできるように、マルチスレッドの機能がサポートされているので、サーバをマルチクライアントに容易に対応させることができる。

- ③ クライアント上で実行された Java アプレットの実行結果に応じた、グラフィック、アニメーションの表示が可能である。

## 4. プログラムの内容

### 4. 1 基準振動の学習プログラムの内容

今回の研究の基礎となる BASIC プログラム[3]の内容は次のようなものであった。

このプログラムは水型分子のみを問題にしたものである。プログラムの流れは、前半と後半に別れており、前半では分子の振動運動についての基本事項や GF 法の説明、後半では GF 法を用いた水型分子の基準振動計算を行い、その計算過程を表示するものであった。

### 4. 2 追加点, 改良点

学習の効果を高めるため、次のような改良および追加を行った。

1. スタンドアローンで実行されるものから、「薬品分析のための電気泳動入門」[9]を参考にし WWW 上で実行できるようにした。これに伴い次のようなメリットが挙げられる。

- ネットワーク環境をもったコンピュータからは、時間や場所に関係なく実行できるようになった。
- キーボードからの入力のみによる操作から、基本的にはマウスでの操作になった。
- GUI(グラフィックユーザインターフェイス)をもった画面により、操作性が向上した。
- 画像を多く取り入れることができるようになった。
- ハイパーテキストという手法により、別画面へのリンクが行えるようになり、項目同士を行き来するための自由度が増した。
- 双方向性をもつ画面の作成が容易になった。

#### 2. 基礎知識の追加

固有値、固有ベクトルについての基礎知識は基準振動を知る上で必要となる。そこで今回、固有値、固有ベクトルとは何かということからはじめ、

さらに、具体例を挙げて固有値、固有ベクトルの求め方を示した。

### 3. プログラムのメニューの変更

BASIC プログラム [3] は、前半は説明のみ、後半は計算のみという構成であったが、今回は大きく5項目に分け、説明画面と演習を交互に行えるような構成にした。

### 4. 演習問題の追加

今回、新たに演習問題を行えるようにし、また学習者1人1人の成績を記録してファイルに保存するようにした。

### 5. 分子の対称性への拡張

今回、分子の対称性 [10] についての知識を追加した。ここでは、分子が対称操作によって変化する様子を、キャラクタを用いて表し、最終的に基準振動の型、縮重の様子が分かるようにした。

## 4. 3 本プログラムの内容

今回作成したプログラムは、当研究室で作成された、「分子の対称性の学習プログラム」 [11] により対称性について学習した人、あるいはこれと同程度の知識をもつ人を対象に作成した。

「分子の対称性学習プログラム」は対称操作について学習することができ、段階的に分子中に存在する対称操作を見つけ出す問題演習ができる。さらに、対称操作があった、なかったの二者択一式のヒントを用いて対称性を分類することができるというものである。

今回のプログラムを用いて、基準振動と分子の対称性の基準振動への適用 [10] について学習できるようにし、また、分子の対称性や基準振動を理解する上で必要な予備知識もカバーし、初歩的なことから学習できるようにした。プログラムの内容を以下の項目に分けてメニュー画面に示した。

### プログラムのメニュー画面

#### i) 分子の基本運動について

並進運動について

回転運動について

振動運動について

#### ii) 2原子分子の振動について

2原子分子の振動運動について

2原子分子の振動運動計算

(振動数の計算、振動数の変化をグラフ表示)

#### iii) G F法の基本事項(G F法の演習問題)

固有値、固有ベクトルについて

GF法の基本事項について

GF法の演習問題

#### iv) G F法による基準振動計算

6種類の分子型についての基準振動計算

(計算過程の表示)

(振動数の変化をグラフで表示)

#### v) 分子の対称性と基準振動

表現マトリクスとキャラクタについて

分子のキャラクタについて

既約表現について(縮重なし、ありの場合)

基本運動のキャラクタ所属について

キャラクタから基本運動の型を求める

基準振動の分類についての演習問題

は演習問題

は振動数の計算による演習

まず項目 i) では分子の基本運動である、並進、回転、振動運動を Java アプレットによるアニメーションを用いて説明を行い、重心の移動と分子全体の回転を行わない、分子の振動運動についての基本的なイメージがわくようにした。

項目 ii) では、分子の振動運動を考える上で最も基本的な分子である、2原子分子をとりあげ、説明を行った。演習として、2原子分子の分子データを画面にあるテキストフィールドに入力し振動計算を行うようにした。さらに分子データの異なる複数の分子について振動計算を行い、振動数の変化をグラフに表すようにした。

項目 iii) では多原子分子の振動計算を行う方法である、G F法の説明を行った。

はじめに、G F法を理解する上で必要な知識である、固有値、固有ベクトルの説明を行った。ここでは、固有値、固有ベクトルが何であるのか、ということから始まり、固有値、固有ベクトルを求める具体例をとりあげて説明を行った。(図4-1)

次に、G F法の説明を行った。ここでは、文章や数式の羅列をできるだけ避け、動きをもつ画面(サブウィンドウ、マウスで画面を触れることによる画像表示の切り替えなど)で効率よく学習を進められるように工夫した。(図4-2)

基本事項の説明を行った後、学習者の理解度を確認するため、確認演習問題が行えるようにした。確認演習問題では、まず、テキストフィールドに学生番号と演習を行った回数を入力する。次に画面に示された設問に対して、選択肢の中から解答を選択する。(図4-3) 定性実験 [12] と同じよ

うに、正解、あるいは3回以上の不正解で次の設問へ移るようにし、解答ごとにヒントを表示するようにした。(図4-4)この演習の結果は、学習者1人1人のファイルに保存するようにした。この成績ファイルの内容は、正解か、不正解か、また不正解時にどのような解答を行ったかについて記録するようにした。

項目iv)では実際にGF法による計算を行う。ここでは $C_n$ ,  $C_{nv}$ ,  $D_{nh}$ ,  $T_d$ の対称性をもつ代表的な分子として、 $C_2$ の $H_2O_2$ 型分子、 $C_{2v}$ の $H_2O$ 型、 $C_{3v}$ の $NH_3$ 型、 $D_{3h}$ の $BH_3$ 型、 $D_{\infty h}$ の $CO_2$ ,  $T_d$ の $CH_4$ 型分子を取り上げた。これらの中から分子を選択し、分子データ(結合距離、結合角、原子質量、力の定数)を入力する。(図4-5)結果表示画面では全ての計算過程を表示するようになっており、画面に配置されたボタンをクリックすることにより、入力した分子データ、あるいは任意の計算過程を表示することができる。振動形の表示では、2方向の断面からその様子を見ることができる。(図4-6)また、各分子型において分子データの異なる複数の分子の振動計算を一度に行い、算出した振動数の変化をグラフに表示できる。(図4-7)

項目v)では、分子の対称性から基準振動の型を求めるまでを、5つの項目に分けて説明を行った。説明画面では、できるだけ多くのグラフィックを示すことができるように、画面に配置されたボタンによって画像が切り替わるよう工夫した。

演習では、項目iv)で取り上げたものと同じ分子型( $H_2O$ 型、 $H_2O_2$ 型、 $NH_3$ 型、 $BH_3$ 型、 $CO_2$ 型、 $CH_4$ 型分子)をとりあげ、画面に表示されたコメントにしたがい、選択した分子型の各対称操作に対する、不変な原子、分子全体の運動、並進運動、回転運動、振動運動に対するキャラクタ、振動運動の既約表現の係数、の値を入力するといった確認演習問題を行うようにした。(図4-8)ここでも、正解、あるいは3回以上の不正解で、正解を画面に表示するようにし、次の設問に移るようにした(図4-9)

この演習の結果はGF法の演習と同様に、学習者1人1人のファイルに保存するようにした。

最後には、どの型の基準振動が赤外活性であるかが分かるようにした。

## 固有値、固有ベクトルについての基本事項

行列とは、数の配列を考えたものをいう。

数を横に並べたものを“行”、縦に並べたものを“列”という。

ベクトルとは、列が1であるときの行列のことである。

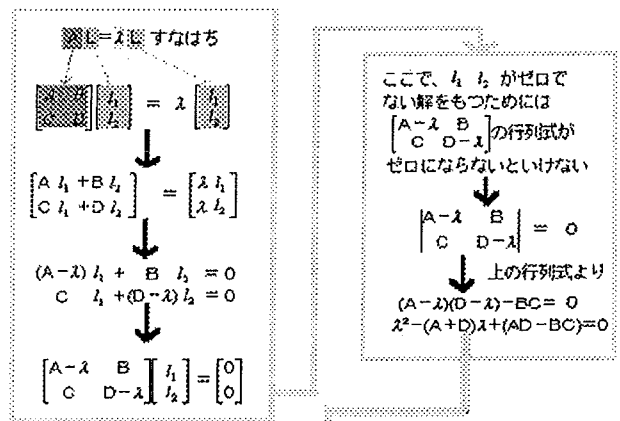
列、行ともに1である行列は値といわれる。したがって

以下の計算は、行列どおしの計算をしているにほかならない。

ある行列A、ある値 $\lambda$ 、あるベクトルL、の間に  $AL = \lambda L$  の関係があるとき  $\lambda$ をAの固有値、LをAの固有ベクトルという。

行列  $A = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$  の固有値、固有ベクトルを求める。

行列  $A = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$  の固有値を  $\lambda$ 、固有ベクトルを  $L = \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix}$  とすると



この $\lambda$ についての2次方程式の解を  $\lambda_1, \lambda_2$  とする。  
この  $\lambda_1, \lambda_2$  は、行列Aの固有値である。

$\lambda = \lambda_1$  の時  $\begin{bmatrix} A - \lambda_1 & B \\ C & D - \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$  この式により、 $l_1, l_2$  が求まる。  
詳細は具体例で示す

$l_1 = l_{11}, l_2 = l_{21}$  とすると、 $\begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} \\ l_{21} \end{bmatrix}$  (は行列Aの固有値  $\lambda_1$  に対する固有ベクトルである。

$\lambda = \lambda_2$  の時  $\begin{bmatrix} A - \lambda_2 & B \\ C & D - \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$  この式により  $l_1, l_2$  が求まる。  
詳細は具体例で示す

$l_1 = l_{12}, l_2 = l_{22}$  とすると  $\begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{12} \\ l_{22} \end{bmatrix}$  (は行列Aの固有値  $\lambda_2$  に対する固有ベクトルである。

具体的な例を見る場合は下の画像をクリックして下さい。

具体例  
行列  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$  の固有値、固有ベクトルを求める。

--- 最初はじめに読む

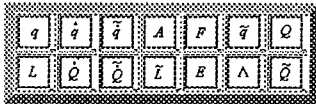
図4-1 固有値、固有ベクトルの説明画面

GF法についての基本事項1

分子中にN個の原子がある時、振動運動の自由度をnとおくと  
 $n = 3N - 6$  (ただし直線分子では  $3N - 5$ ) である。  
 このn個の座標を、 $q_1, q_2, q_3, \dots, q_n$  とする。  
 $q_1, q_2, q_3, \dots, q_n$  は化学結合の長さや、結合角等の  
 平衡位置からのずれの大きさである。

下の式をクリックすると行列式で表現した式ができます。

行列式の中に示されている記号はそれぞれ行列を表すものである。(n=3の場合)



1. 分子内振動運動の運動エネルギーT及び位置エネルギーVは次の形で表される。

$$T = \frac{1}{2}(a_{11}\dot{q}_1^2 + a_{22}\dot{q}_2^2 + a_{33}\dot{q}_3^2 + \dots + a_{nn}\dot{q}_n^2 + 2a_{12}\dot{q}_1\dot{q}_2 + 2a_{23}\dot{q}_2\dot{q}_3 + \dots + 2a_{n-1n}\dot{q}_{n-1}\dot{q}_n)$$

$$V = \frac{1}{2}(f_{11}q_1^2 + f_{22}q_2^2 + f_{33}q_3^2 + \dots + f_{nn}q_n^2 + 2f_{12}q_1q_2 + 2f_{23}q_2q_3 + \dots + 2f_{n-1n}q_{n-1}q_n)$$

2. クロスタームをなくすために  $q_1$  から  $q_n$  を  $Q_1$  から  $Q_n$  に変換するにあたって仮に次のようにおく。

$$q_1 = L_{11}Q_1 + L_{12}Q_2 + L_{13}Q_3 + \dots + L_{1n}Q_n$$

$$q_2 = L_{21}Q_1 + L_{22}Q_2 + L_{23}Q_3 + \dots + L_{2n}Q_n$$

$$q_3 = L_{31}Q_1 + L_{32}Q_2 + L_{33}Q_3 + \dots + L_{3n}Q_n$$

$$\dots$$

$$q_n = L_{n1}Q_1 + L_{n2}Q_2 + L_{n3}Q_3 + \dots + L_{nn}Q_n$$

3.  $L_{11}$  から  $L_{nn}$  をうまく選べばクロスタームがなくなり次のようになる。

$$T = \frac{1}{2}(\dot{Q}_1^2 + \dot{Q}_2^2 + \dot{Q}_3^2 + \dots + \dot{Q}_n^2)$$

$$V = \frac{1}{2}(\lambda_1 Q_1^2 + \lambda_2 Q_2^2 + \lambda_3 Q_3^2 + \dots + \lambda_n Q_n^2)$$

4. するとT, Vは  $Q_1$  から  $Q_n$  のそれぞれの座標ごとに分けることができる。

$$T_1 = \frac{1}{2}\dot{Q}_1^2, T_2 = \frac{1}{2}\dot{Q}_2^2$$

$$T_3 = \frac{1}{2}\dot{Q}_3^2, T_4 = \frac{1}{2}\dot{Q}_4^2$$

$$T_5 = \frac{1}{2}\dot{Q}_5^2, T_6 = \frac{1}{2}\dot{Q}_6^2$$

$$\dots$$

$$T_n = \frac{1}{2}\dot{Q}_n^2, T_{n+1} = \frac{1}{2}\dot{Q}_n^2$$

5.  $Q_1$  から  $Q_n$  の座標についてそれぞれ次のようにエネルギーと振動数を持つ。

$$E_1 = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_1} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad x = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_1}$$

$$E_2 = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_2} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad x = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_2}$$

$$E_3 = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_3} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad x = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_3}$$

$$\dots$$

$$E_n = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_n} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad x = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\lambda_n}$$

図4-2 GF法の説明画面の例

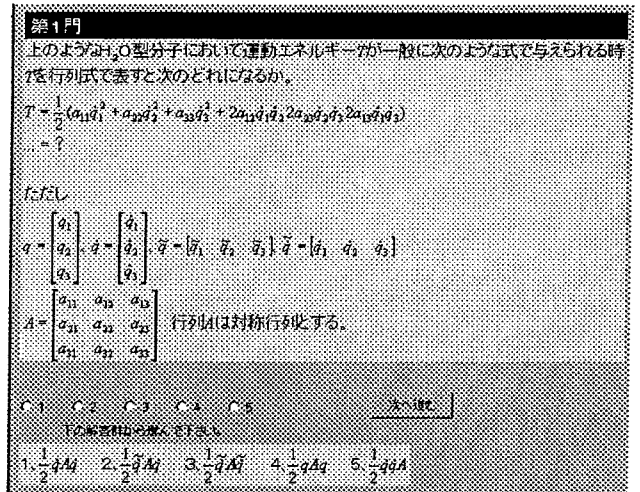


図4-3 GF法確認演習問題の実行画面

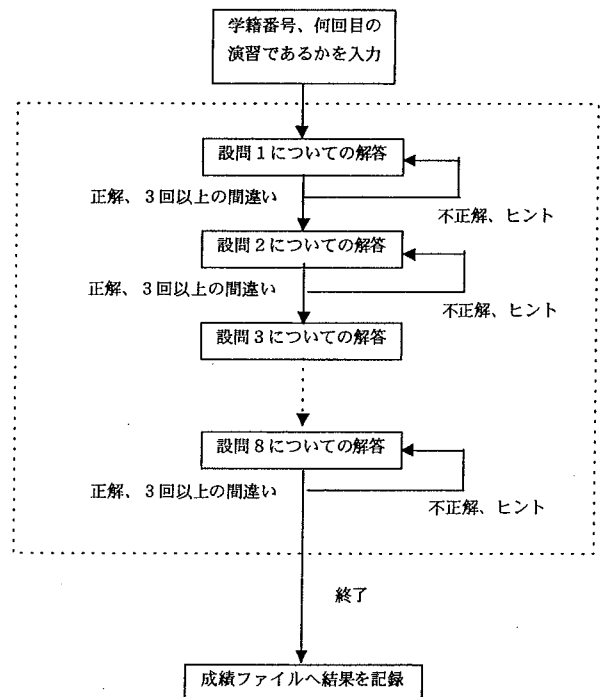


図4-4 GF法確認テスト：プログラムの流れ

5. プログラムの説明

5.1 Java アプレットに関するプログラムの基本構造

今回は、サーバ側で動くファイル操作のプログラムを除くと、ブラウザ上で動くJavaアプレットの作成が主であった。Javaアプレットを作成するためには、アプレットクラスを継承したプログラムを作成する必要がある。アプレットクラスを継承したプログラムの構成は基本的に図5-1の

ようになる。

分子データ入力画面

- 以下の手順にしたがって下さい。
1. まず、計算したい分子の型をクリックする。
  2. 分子のデータを入力する。
  3. 学生番号を入力する。
  4. "このデータで計算する"というボタンをクリックする。

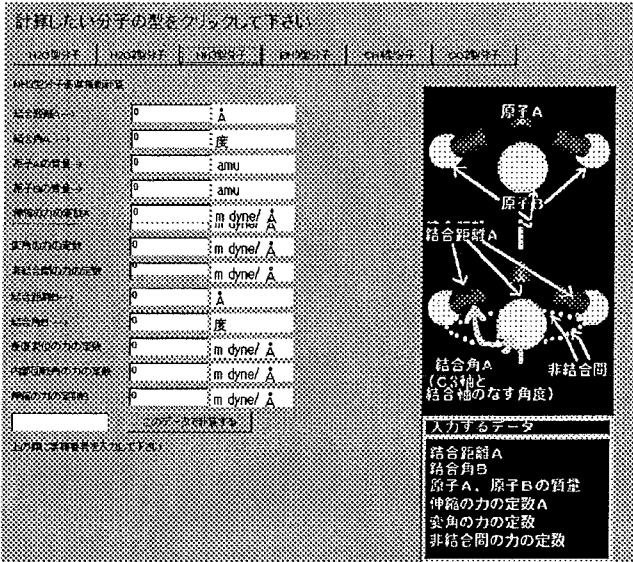


図4-5 基準振動計算の分子データ入力画面

学生番号を入力して下さい。よければOKボタンを押して下さい。各々のボタンで結果を表示します。

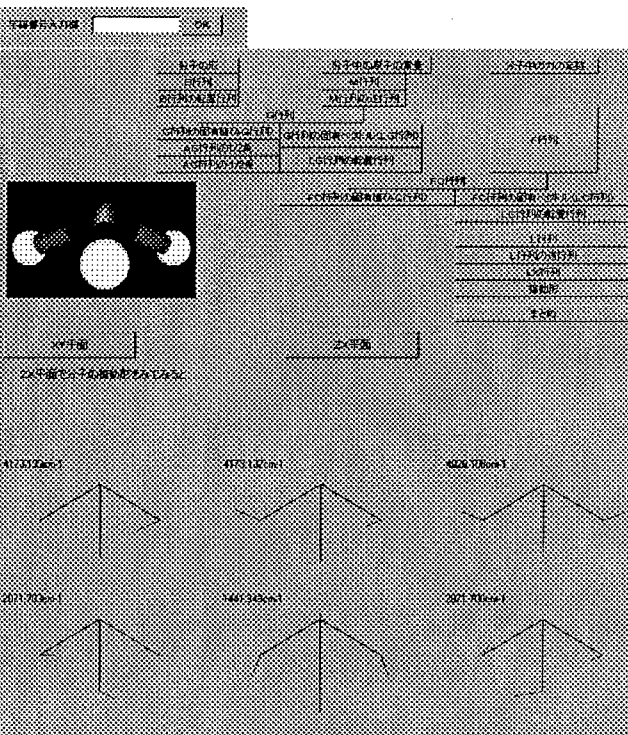


図4-6 CH<sub>4</sub>型分子振動形表示

いくつかの分子の振動数の変化をグラフでみる

学生番号を入力して下さい。よければOKボタンを押して下さい。  
 "振動数をグラフでみる"というボタンをおすとグラフが表示されます。下に右あたりの入力した分子のデータが表示されます。

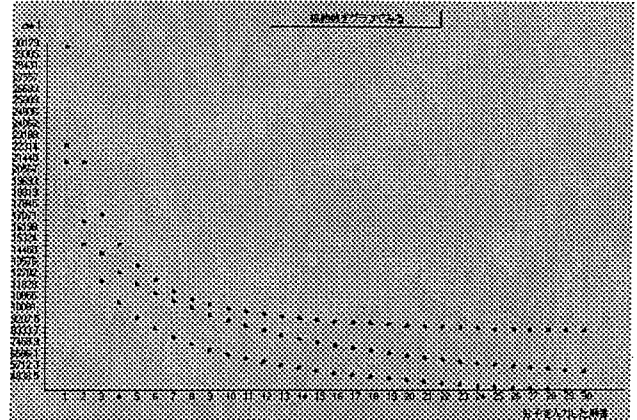


図4-7 基準振動計算結果表示、振動数の変化のグラフ表示画面

H<sub>2</sub>O型分子の対称性と基準振動

一番下のコメントにしたがって進んで下さい。  
 わからない場合は、ヒント1、ヒント2、をクリックして下さい。  
 ヒント1、2をクリックして新たに出てきた画面は見終わったら必ず閉じること！！  
 ヒント1: 原点座標のまわりの対称  
 ヒント2: 原点座標から原子座標の位置を求める  
 9F 法系振動計算の結果(=振動形)と比較して下さい。

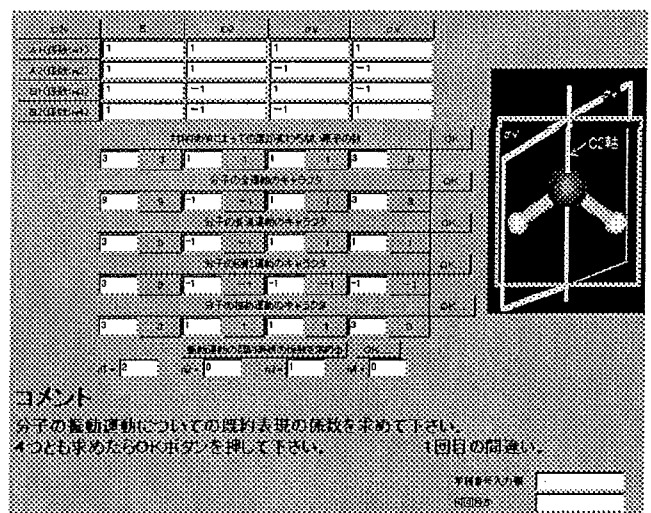


図4-8 分子の対称性から基準振動の型を求める演習問題の実行画面

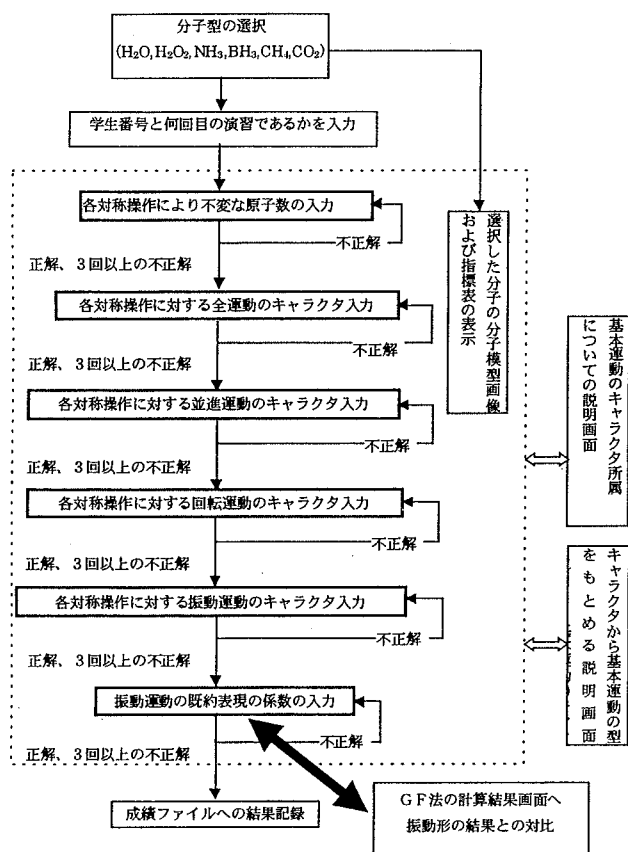


図4-9 基準振動の型を求める演習問題：プログラムの流れ

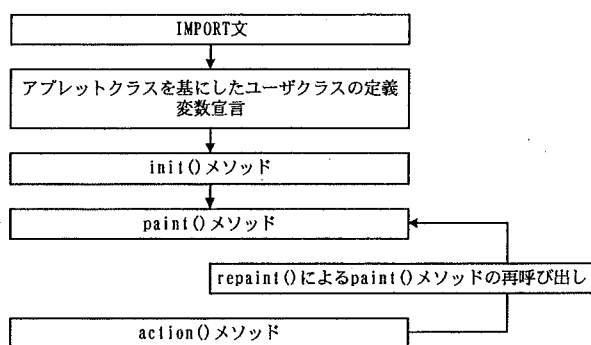


図5-1 プログラムの基本構造

## 5.2 演習プログラムのフローチャート

GF法確認演習問題に関する `paint()` メソッドのフローチャートは図5-2, `action()` メソッドのフローチャートは図5-3に示す。

基準振動の型を求める演習問題に関する `paint()` メソッドのフローチャートを図5-4に示す。

GF法による基準振動計算を行うプログラムでは、B行列の配列を定義したファイル、F行列の配列を定義したファイルをそれぞれの分子型について作成し、メインプログラムから、要求に応じて読み込むようにした。また、固有値、固有ベクトルを求めるJacobi法のプログラムも用意し、同じようにメインプログラムから読み込むようにした。

`Action()` メソッドのフローチャートは図5-5に示す。

## 5.3 プログラムの作成

分子模型画像は、MOLDA [13] とスーパーKIDを用いて行い、数式などの画像はWordとスーパーKIDを用いて作成した。今回、Javaのプログラム作成には、Visual Café (Symantec) を用いた。

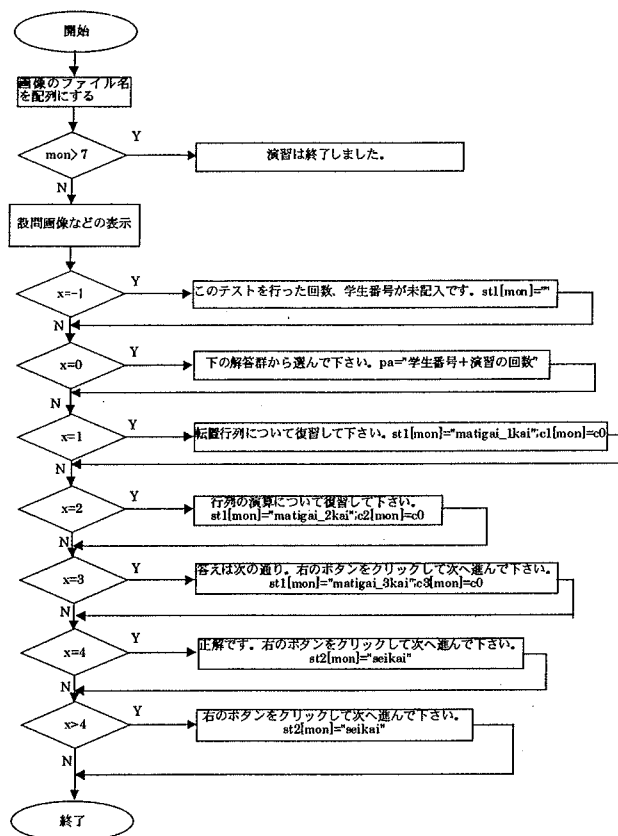


図5-2 GF法確認テストのフローチャート `paint()` メソッド



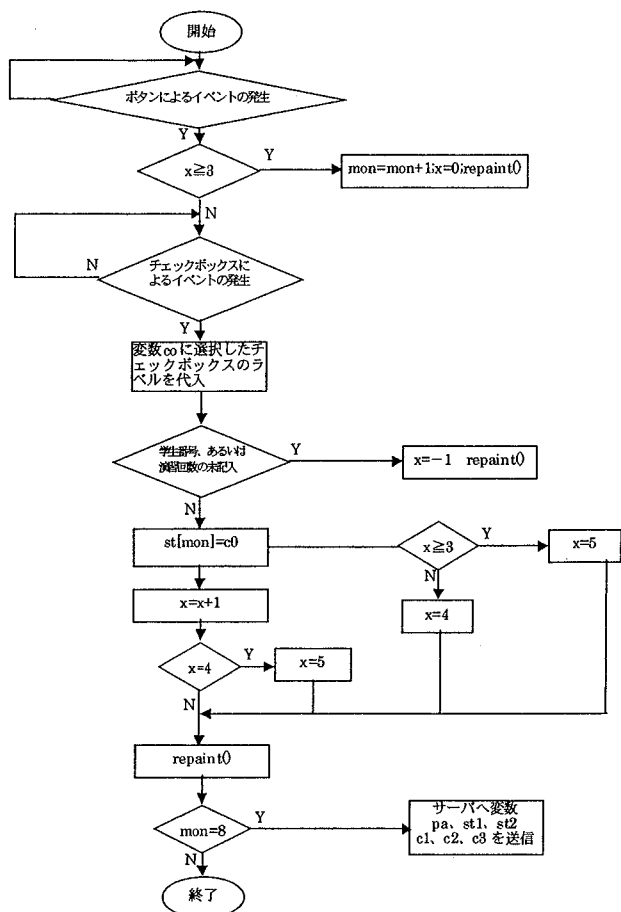


図5-3 GF法確認テストのフローチャート  
action()メソッド

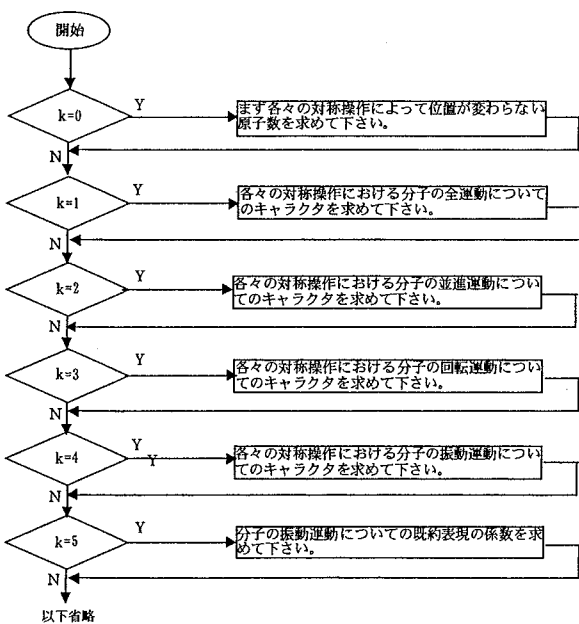


図5-4 対称性による基準振動の分類テスト  
のフローチャート

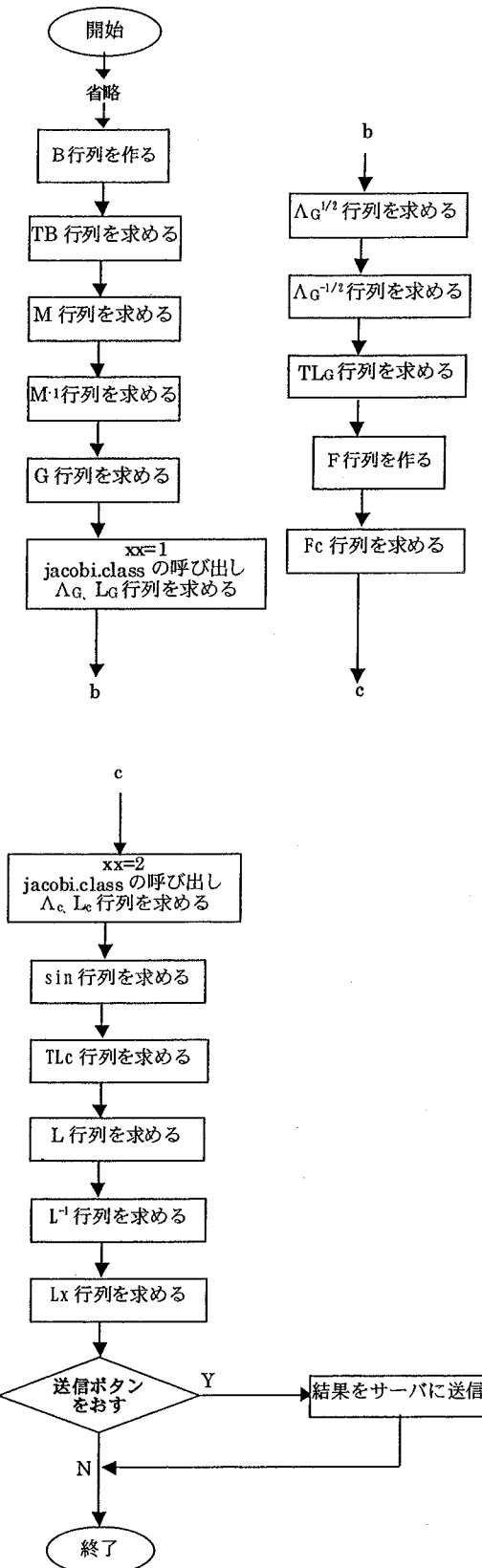


図5-5 基準振動計算のフローチャート

## 6. まとめ

今回、Javaにおける、分子の対称性と基準振動の学習プログラムへの適用を検討した。Javaを用いた双方向通信は、アクセスが集中しても負担が小さいので、サーバはパソコンで十分であることが分かった。従って、このシステムが真価を発揮するのは、多くの端末が一斉にアクセスして双方向通信を行う場合であるということがいえる。

しかしながら、Javaで一番問題になるのは、クライアント側の負荷の大きさである。Javaアプレットの場合はクライアント側のCPUの性能に実行速度が大きく依存してしまう。マシンの種類やCPUパワーの度合いによって、表示が使用に耐えないほど遅くなることがあり得るようである。

(榊原研究室、講義用電子掲示板によせられた学生の声より)この点をふまえ、Javaの有効利用について更に検討する必要があるといえる。

今後の課題として、次のような点が考えられる。

- GF法確認テストの内容の充実をはかる。つまり、設問数の追加、あるいは、解答ごとに表示するヒントの内容を充実させること。
- GF法の説明画面では、Urey-Bradley力場以外の分子力場によるF行列の求め方についての説明も行うこと。
- クライアント側のJavaアプレットで計算した振動計算結果を、プラグインソフトである、VRMLなどの3次元立体模型表示アプリケーションと、何らかの方法によって連携させることについての検討を行うこと。
- 分子の対称性の学習プログラム[11]と本プログラムを同時に学習できるようにし、学習内容の幅を広げること。
- GF法基本事項の説明画面の充実をはかること。

## 参考文献

- [1] 小林昭三：「インターネット・JAVA活用による物理教材の開発」,  
<http://kakuda.ed.niigata-u.ac.jp/PCC728.html>1997.  
 石井晃：Java言語による分子動力学ライブラリ，鳥取大学工学部研究報告，28巻，1号，pp. 269-280, 1998.
- [2] 桐山雄一郎，鈴木久雄，尾崎成子，矢野敬幸，上田望，ネットワーク新時代に対応した新しい

講義システムの試み(2)-Javaを利用した対話的教育支援システムの構築-, J. Chem. Software, 5, 1-14 (1999).

- [3] 増原良子：卒業論文「基準振動の学習プログラム」, 1997.
- [4] 水島三一郎，島内武彦：赤外線吸収とラマン効果，共立全書.
- [5] 日本化学会編：赤外線吸収スペクトル実験化学講座(続)10巻，丸善.
- [6] 森野米三，坪井正道：現代物理化学講座3，分子の構造，東京化学同人.
- [7] 島内武彦：化学の領域：増刊85号，分光化学68B 別冊，南江堂.
- [8] 中田昭雄：AN HTTP Server Home Page  
<http://www.st.rim.or.jp/~nakata/>
- [9] 田ヶ原清，小山淳子，豊国いずみ，紀野あかり，下村克彦，西博行，井上勤，榊原正明，増原良子，坂本光歩，高見和邦：薬品分析のための電気泳動入門，化学教育ジャーナル(CEJ)，第2巻，第2号，1998.
- [10] 佐藤純夫：「化学群論序説」，講談社.
- [11] 榊原正明，立花良一，村畑太郎：分子の対称性についての学習プログラム，鳥取大学工学部研究報告，29巻，1号，pp. 99-114, 1998.
- [12] 榊原正明，高見和邦，堀内敏史，増原良子：ネットワークを利用したインタラクティブなソフトウェア，鳥取大学工学部研究報告，29巻，1号，pp. 85-97, 1998
- [13] 吉田 弘：MOLDA Home Page The Kingdom of Cybermolecules  
<http://molda.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/molda-j/welcome.htm>

(受理 平成13年9月26日)